https://jmme.um.ac.ir/	DOI: 10.22067/jmme.2022.75661.1043

بررسی ترمودینامیکی و عملی فازهای سیلیسید آهن قابل تولید از سیستم پودری آهن و سیلسیم*

مقاله پژوهشی

راضیه خوشحال(۱)

چکیده *از واکنش سیستم پودری آهن و سیلسیم، انواع مختلف سیلیسیدهای آهن شکل می‌گیرد که بسته به ساختارشان رفتار فلزی، نیمه هادی یا عایق را می‌توانند از خود نشان دهند. هر چه میزان آهن این مواد بیشتر باشد، خواص مغناطیسی آنها قویتر خواهد بودیکی از مسائل تکنیکی استفاده از پودر برای تولید انواع مختلف سیلسیدها، پیش‌بینی نوع سیلسید نهایی است. تا کنون تحقیق جامعی بر روی این هدف تدوین نشده است. از این رو در این تحقیق ابتدا بر اساس داده‌های ترمودینامیکی و به کمک نرم‌افزار HSC پیش‌بینی شد که در هر نسبت مولی آهن و سیلسیم کدامیک از فازهای سیلسید آهن تشکیل خواهد شد. در ادامه به صورت آزمایشگاهی سه درصد مختلف مولی برای بررسی عملی این پیش‌بینی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با افزایش نسبت مولی سیلسیم از ۰/۵ به ۱ و ۲ ، به ترتیب، فازهای Fe_3Si، FeSi و $FeSi_2$ فازهای غالب موجود در ساختار خواهند بود که تا حد زیادی پیش‌بینی‌های ترمودینامیکی با نتایج واقعی موافقت داشت. علت تفاوتهای موجود نیز مورد بحث قرار گرفت.*

واژه‌های کلیدی سیلیسید آهن، ترمودینامیک، آهن، سیلیسیم، سیستم پودری.

مقدمه

در سیستم فازی آهن و سیلیسیم حداقل پنج ترکیب شناخته شده سیلیسید آهن وجود داردکه عبارتند از Fe_3Si،Fe_5Si_3، FeSi، β-$FeSi_2$ و α-$FeSi_2$ مطابق با نمودار تعادلی فازی، ε-FeSi، β-$FeSi_2$ و Fe_3Si در دمای اتاق پایدار هستند، در حالی که Fe_2Si، α-$FeSi_2$ وFe_5Si_3 غیر پایدار هستند. این سیلیسیدهای آهن بسته به ساختارشان رفتار فلزی، نیمه هادی یا عایق از خود نشان می‌دهند. خواص آهنربایی مغناطیسی در فازهای غنی از آهن Fe_3Si و Fe_5Si_3بیشتر مشاهده می‌شود [1-4]. FeSi به عنوان یک عایق عمل می‌کند که با دما افزایش رسانایی در آن اتفاق می‌افتد. همچنین برای دی اکسید کردن فولاد نیز کاربرد دارد [5,6]. β-$FeSi_2$ یک باندگپ باریک (۰٫۸۵ eV) دارد و نیمه هادی محسوب می‌شود و پتانسیل استفاده شدن به عنوان مواد فتوولتائیک را دارد چرا که دارای خواص فوتولومینسانس است [7,8]. α-$FeSi_2$ نیز یک فاز متا استیبل است که حالت فلزی دارد و به صورت بالقوه برای سلولهای خورشیدی مبتنی بر سیلیکون مفید است [9]. Fe_3Si هم نامزد خوبی برای دستگاه الکترود مغناطیسی دستگاه-های بازرسی الکترونیکی مانند اتصالات تونل مغناطیسی است چرا که یک ماده فرومغناطیس است و تا دمای ۸۴۰ کلوین خواصش را حفظ می‌کند [3]. از روش‌های مختلفی جهت تولید این دسته از مواد استفاده شده است. برای مثال یکی از این روش‌ها، روش‌های شیمی تر است [10]. روش پلاسما [11] و روش متالورژی پودر [12] نیز می‌تواند برای تولید این دسته از مواد استفاده شود. هر یک از محققین بر اساس روش به کار برده شده، فازهای مختلفی را گزارش کرده‌اند و به درستی مشخص نیست که با افزایش درصد سیلسیم افزوده شده به آهن چه فازهایی در حالت پودری شکل می‌گیرند. برای مثالDezsi و همکارانش [13] به روش آلیاژسازی مکانیکی، سنتز دی سیلید آهن را انجام داند. آنها نشان دادند که بسته به دوره آسیاب ، ε-FeSi، α-$Fe_{1-x}Si_2$ و $FeSi_2$ آمورف تشکیل می‌شود. فاز β-$FeSi_2$ نیز پس از آنیل کردن پودر در دمای پایداری این فاز تشکیل شده است. Guown [14] نشان داد که با افزایش سیلیسیم فاز FeSi به وجود آمده به فاز $FeSi_2$ تبدیل می‌شود. Yeh و همکارانش نیز از طریق احیای اکسید آهن به کمک آلومینیم به تولید FeSi پرداخته و نهایتا کامپوزیت $FeSi$-Al_2O_3 را به عنوان محصول نهایی گزارش کرده است. در هر دو ترکیب استوکیومتری استفاده

* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۰/۱۲/۱۴ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۱/۴/۱۳ می‌باشد.

(۱) راضیه خوشحال، استادیار گروه مهندسی مواد دانشگاه صنعتی بیرجند.

Email: rkhoshhal@birjandut.ac.ir

شده در این تحقیق، تنها تولید فاز FeSi به عنوان فاز غالب گزارش شده است. Crecelius [15] نیز به بررسی واکنش‌های لایه ۱۰ نانومتری از آهن و سیلسیم تک کریستال پرداخته است. درجه حرارت اعمال شده در این تحقیق ۸۵۰ درجه سانتیگراد بوده است. β-$FeSi_2$ فازی بوده که تشکیل آن در شرایط کاری ایشان گزارش شده است. هیچکدام از این تحقیقات به تاثیر مستقیم استوکیومتری آهن و سیلسیم بر محصول نهایی حاصل از زینتر پوردهای عنصری آهن و سیلسیم در دماهای مختلف نپرداخته‌اند. از طرفی پیش‌بینی‌های ترمودینامیکی و نمودارهای تعادلی، اغلب بر اساس سرد شدن از فاز مایع تهیه شده‌اند. لذا شاید در مواردی با واکنش‌های انجام شده در حالت جامد (حالت‌های پودری) متفاوت باشد. از این رو در این تحقیق سعی شده است با تغییر درصد سیلسیم افزوده شده به آهن در حالت پودری، واکنشهای محتمل و فازهای تشکیل شده مورد بررسی قرار گیرد و با مقایسه نتایج با بررسی پیش‌بینی‌های ترمودینامیکی، سیستم واکنش آهن–سیلسیم به درستی شناخته شود.

روش تحقیق

بررسی ترمودینامیکی سیستم آهن–سیلسیم

برای بررسی ترمودینامیکی سیستم آهن–سیلسیم از نرم افزار HSC chemistry 5.11 استفاده شد. ابتدا انرژی آزاد تشکیل فازهای مختلف مورد بررسی قرار گرفت تا پایداری انواع سیلیسیدهای آهن در دماهای مختلف مقایسه شود. در ادامه ترکیبات تعادلی موجود در سیستم آهن– سیلسیم مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور فرض شد که در سیستم تنها آهن (۱ مول) موجود باشد و سیلسیم به صورت مرحله به مرحله به آهن افزوده شود (در ۲۱ مرحله). نهایتا از طریق نرم‌افزار فازهای تعادلی پیش‌بینی شد.

بررسی عملی واکنشهای سیستم پودری آهن– سیلسیم

پس از بررسی‌های ترمودینامیکی، برای بررسی عملی واکنشهای سیستم پودری آهن–سیلسیم، ابتدا نسبت‌های مولی ۰,۵، ۱ و ۲ مول سیلسسیم به ۱ مول از آهن (هر دو با خلوص ۹۸ درصد با اندازه زیر ۱۰ میکرون تهیه شده از شرکت مرک) مخلوط شد. سپس از مخلوط حاصل، نمونه‌های ۲ گرمی به شکل استوانه با قطر ۱ سانتیمتر تحت پرس ۳۰۰ PSI تهیه شد و در ادامه، نمونه-های حاصل در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد در اتمسفر آرگون خالص شده، تحت حرارت قرار گرفت. برای تعیین ترکیبات حاصل، محصول به دست آمده به کمک آنالیز XRD تحت بررسی قرار گرفت. برای بررسی میکروساختار برخی از نمونه‌ها از میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) بهره برداری شد.

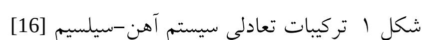
نتایج و بحث

بررسی‌های ترمودینامیکی

در ابتدای امر، نمودار تعادلی آهن–سیلسیم بررسی می‌شود. همانطور که در شکل (۱) نشان داده شده است، پنج ترکیب اصلی Fe_3Si، Fe_5Si_3، FeSi، β-$FeSi_2$ و α-$FeSi_2$ در این سیستم موجود است.

انرژی آزاد تشکیل فازهای تعادلی سیستم آهن– سیلسیم توسط نرم‌افزار HSC [17] استخراج و رسم شد (شکل ۲). مشاهده شد که ترکیب Fe_5Si_3 منفی‌ترین انرژی آزاد استاندارد را به خودش اختصاص داده است. پس انتظار می‌رود که این فاز در سیستم‌های پودری زودتر از بقیه تشکیل شود. پس از این ترکیب، به ترتیب فازهای Fe_3Si، FeSi و $FeSi_2$ در شرایط مناسب‌تری جهت تولید قرار می‌گیرند. کلیه اطلاعات ترمودینامیکی تشکیل فازهای مختلف سیلیسید آهن مورد بررسی در دماهای مورد نظر تحقیق حاضر در جدول (۱) آورده شده است.

برای بررسی‌های بیشتر ترمودینامیکی، نمودار فازهای تعادلی سیستم آهن– سیلسیم نیز رسم شد. برای این منظور یک مول آهن به عنوان اولین ماده اولیه موجود در سیستم فرض شد و به آن در ۲۱ مرحله در هر مرحله 0.142 مول سیلسیم اضافه شد. همانطور که در شکل (۳) نشان داده شده است، در ابتدا با ورود سیلسیم به آهن و واکنش با آن فاز Fe_3Si تولید می‌شود. با افزایش میزان بیشتری از Si، مقادیر بسیار کمی Fe_5Si_3 تولید می-شود که در مقایسه با میزان FeSi به وجود آمده قابل توجه نیست. علت این امر را شاید بتوان به میزان آهن در دسترس مربوط دانست. به این معنی که با افزایش میزان سیلسیم، فازی که آهن بیشتری دارد در شرایط تولید سخت‌تری قرار می‌گیرد. و از آنجا که واکنشها در حالت جامد انجام می‌شوند، نفوذ در مقایسه با حالت مذاب، سخت‌تر رخ می‌دهد. از طرفی بر روی پودر مواد اولیه کار مکانیکی انجام نشده است تا سرعت نفوذ افزایش پیدا کند [18,19]. نهایتاً با افزایش بیشتر سیلسیم از مقدار FeSi کاسته و به مقدار $FeSi_2$ افزوده می‌شود.



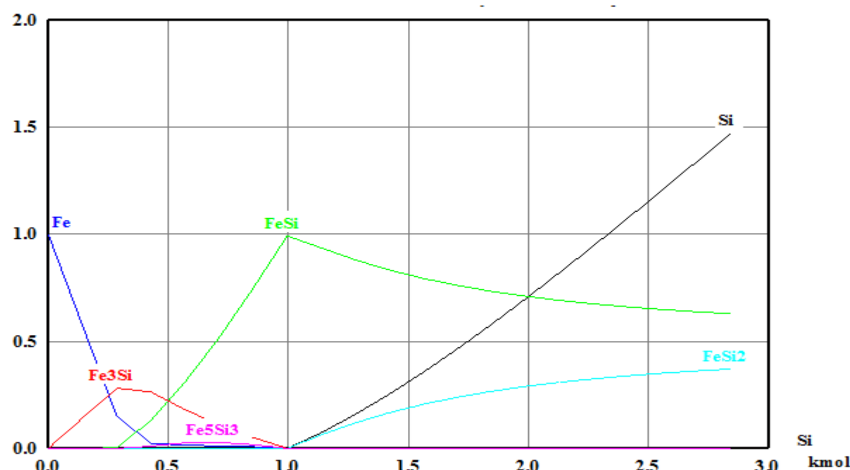
شکل ۱ ترکیبات تعادلی سیستم آهن–سیلسیم [16]



شکل ۲ مقایسه انرژی آزاد تشکیل فازهای سیلیسید آهن (استخراج شده به کمک نرم‌افزار HSC).

جدول ۱ اطلاعات ترمودینامیکی واکنشهای تشکیل سیلیسیدهای آهن مورد مطالعه در این تحقیق در دماهای مورد بررسی

نوع واکنش	800°C			900°C			1000°C		
	ΔH(kJ)	ΔS(J/K)	ΔG(kJ)	ΔH(kJ)	ΔS(J/K)	ΔG(kJ)	ΔH(kJ)	ΔS(J/K)	ΔG(kJ)
Fe + Si = FeSi	-84.877	-8.968	-75.252	-85.695	-9.702	-74.313	-86.424	-10.328	-73.275
$5Fe + 3Si = Fe_5Si_3$	-261.43	0.512	-261.98	-264.16	-1.939	-261.89	-266.557	-4.044	-261.41
$Fe + 2Si = FeSi_2$	-89.124	-19.94	-67.716	-90.127	-20.848	-65.671	-91.009	-21.598	-63.511
$3Fe + Si = Fe_3Si$	-93.387	7.174	-101.08	-93.277	7.243	-101.774	-91.275	8.789	-102.46



شکل ۳ نمودار فازهای تعادلی محاسبه شده در سیستم آهن– سیلسیم با فرض اضافه شدن سیلسیم به آهن (محاسبه شده به کمک نرم‌افزارHSC.

بررسی های عملی و آزمایشگاهی

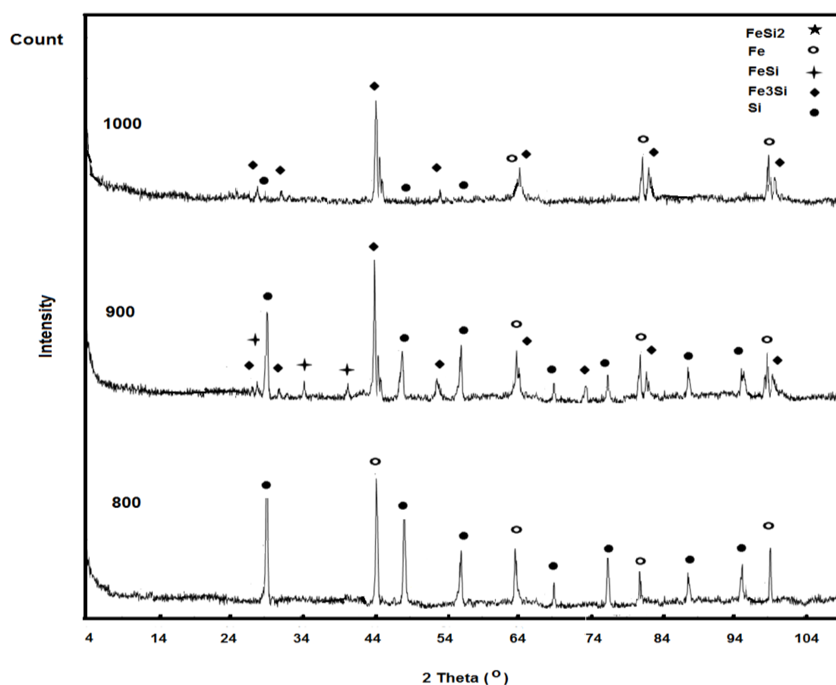
برای مقایسه نتایج به دست آمده ترمودینامیکی و مقادیر واقعی تجربی، نسبت مشخصی از پودرهای آهن و سیلسیم (با نسبت های مولی یک مول آهن و۰/۵، ۱ و ۲ مول سیلسیم) مورد بررسی قرار گرفت.

بررسی عملی واکنش‌های سیستم با نسبت مولی ۱ به ۰،۵ از آهن و سیلسیم

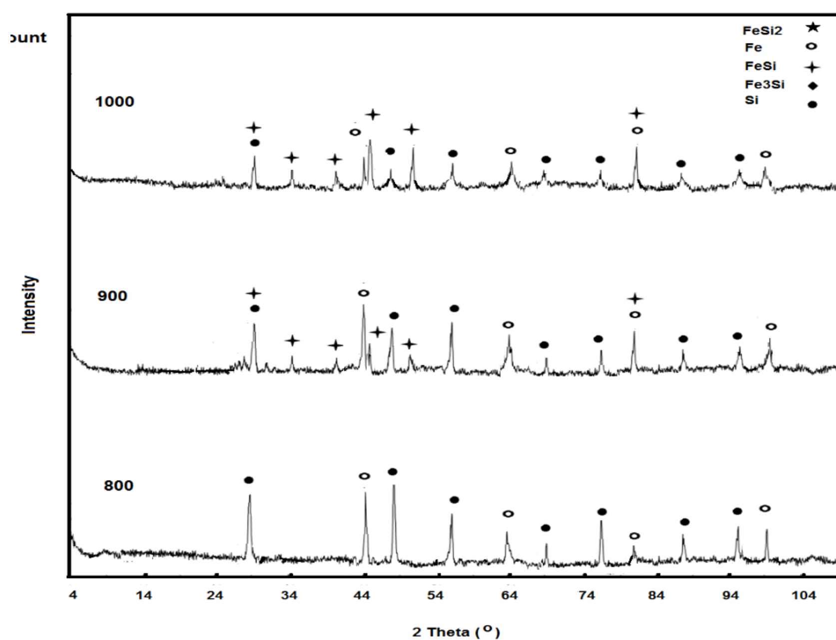
بر اساس شکل (۳) حاصل از بررسی فازهای تعادلی این سیستم پیش بینی می‌شد که ابتدا فاز Fe_3Si و در ادامه فاز FeSi شکل بگیرد. این نتایج تا حد خوبی با نتایج به دست آمده در مدل پودری مورد بررسی نیز همخوانی دارد. همانطور که در شکل (٤) آورده شده است، در دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد، واکنش خاصی بین مواد اولیه سیلسیم و آهن، صورت نگرفته است اما با افزایش دما به ۹۰۰ درجه سانتیگراد، هر دو فاز پیش بینی شده ترمودینامیکی در این نتیجه XRD قابل مشاهده است که البته با افزایش بیشتر دما، فاز FeSi کامل حذف شده است. احتمالا دلیل اینکه در دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد، واکنش خاصی بین مواد اولیه رخ نداده است، انجام واکنش‌ها در حالت جامد است. در مقایسه با نفوذ در حالت مذاب، نفوذ در حالت جامد سخت تر و زمان بر است. لذا کندی انجام واکنش‌ها در جالت جامد از این دیدگاه قابل توجیه است.

همانطور که پیش از این نیز اشاره شد، انواع فازهای سیلیسید آهن با روش‌های مختلف تهیه شده است. برای مثال Naween Dahal و همکارانش [10] به کمک روش شیمی تر نشان دادند که در مقادیر بالای آهن فاز Fe_3Si به وجود می‌آید و در مقایر بیشتر سیلسیم فاز β-$FeSi_2$ پایدار است.

Dezsi و همکارانش [13] به روش آلیاژسازی مکانیکی، سنتز دی سیلید آهن را انجام داند. آنها نشان دادند که بسته به دوره آسیاب، می‌تواند فازهای، α-$Fe_{1-x}Si_2$، و یا فاز $FeSi_2$ آمورف تشکیل شود. فاز β-$FeSi_2$ نیز پس از آنیل کردن پودر در دمای پایداری این فاز تشکیل شده است. Guown [14] نشان داد که با افزایش سیلسیم فاز FeSi به فاز $FeSi_2$ تبدیل می‌شود. Yeh و همکارانش [20] نیز از طریق احیای اکسید آهن به کمک آلومینیم به تولید FeSi پرداخته و نهایتا کامپوزیت FeSi-Al_2O_3 را به عنوان محصول نهایی گزارش کرده است. در هر دو ترکیب استوکیومتری استفاده شده در این تحقیق، تنها تولید فاز FeSi گزارش شده است. Crecelius [15] به بررسی واکنشهای لایه ۱۰ نانومتری آهن و سیلسیم تک کریستال پرداخته است. درجه حرارت اعمال شده در ای تحقیق ۸۵۰ درجه سانتیگراد بوده است. β-$FeSi_2$ فازی بوده که تشکیل آن در شرایط کاری ایشان گزارش شده است. Shen [12] با استفاده از مخلوط آسیا شده ۹۳،۵٪ وزنی آهن و ٦،۵ درصد وزنی سیلسیم نشان داده است که بعد از رسیدن مخلوط پودری به دمای ۹۰۰ درجه سانتیگراد فازهای FeSi و Fe_3Si در ساختار شکل می‌گیرند که با افزایش تا ۱۰۵۰، فاز FeSi حذف و تنها فاز Fe_3Si پایدار باقی می‌ماند. همین امر نشان می‌دهد که فاز Fe_3Si در دماهای بالاتری پایدار است. دمای مناسب انجام واکنشها هم حدود ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد گزارش شده است.



شکل ٤ نتیجه XRD نمونه حاوی نسبت مولی ۱ به ۰٫۵ از آهن و سیلسیم که به مدت ۳ ساعت در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار گرفته است.



شکل ۵ نتیجه XRD نسبت مولی ۱ به ۱ از آهن و سیلسیم که به مدت ۳ ساعت در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار گرفته است

بررسی عملی واکنش‌های سیستم با نسبت مولی ۱ به ۱از آهن و سیلسیم

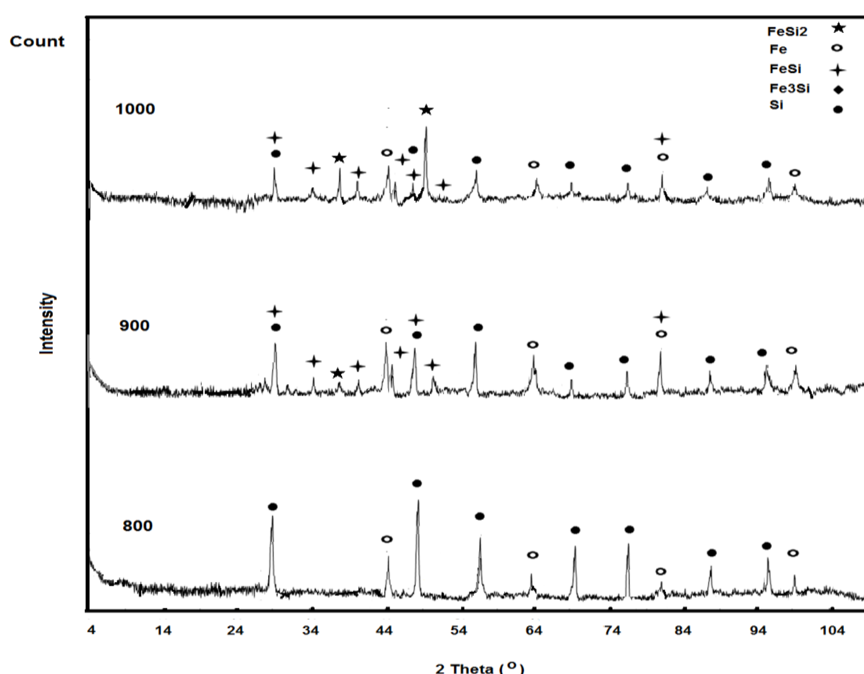
بررسی ترمودینامیکی انجام شده در شکل (۳)، تنها فاز پیش بینی شده در این نسبت استوکیومتری را FeSi پیش بینی می‌کرد. نتایج عملی نیز تا حد زیادی با این پیش بینی در توافق بود. همانطور که در شکل (۵) نشان داده شده است از نتیجه XRD نسبت

مولی ۱ به ۱ از آهن و سیلسیم که به مدت ۳ ساعت در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار گرفته است، می‌توان برداشت کرد که در دمای ۸۰۰، تنها مواد اولیه آهن و سیلسیم در سیسم حضور دارند و واکنش خاصی بین آنها رخ نداده است. با افزایش دما به ۹۰۰، فاز FeSi در ساختار ایجاد شده است که با افزایش دما به ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد همچنان به عنوان تنها فاز غالب در سیستم موجود است. در عین حالیکه درصدی از مواد اولیه نیز واکنش نکرده باقی مانده است.

بررسی عملی واکنش‌های سیستم با نسبت مولی ۱ به۲ از آهن و سیلسیم

نتیجه XRD نسبت مولی ۱ به ۲ از آهن و سیلسیم که به مدت ۳ ساعت در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار گرفته است، در شکل (٦) آورده شده است. همانطور که در این شکل دیده می‌شود، پس از عبور از دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد که تنها مواد اولیه در آن دیده می‌شوند به دماهای بالاتر، واکنشها آغاز می‌شوند. در دمای ۹۰۰ درجه سانتیگراد، فاز FeSi در ساختار شکل می‌گیرد. با افزایش بیشتر دما به ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد فاز $FeSi_2$ نیز در ساختار دیده می‌شود. این موضوع موید این مطلب است که در درصدهای بیشتر سیلسیم، فاز FeSi در دماهای بالاتر به فاز $FeSi_2$ تبدیل می‌شود. اگر این نتیجه به دست آمده با نتایج حاصل از پیش‌بینی ترمودینامیکی مقایسه شود (شکل ۳)، مشخص می‌شود که نتایج عملی تا حد زیادی بر نتایج ترمودینامیکی مطابقت دارد. البته احتمالا پایداری فاز $FeSi_2$ در مقایسه با FeSi با وجود منفی تر بودن انرژی آزاد تشکیل FeSi (شکل ۲) به میزان Si در دسترس که فرایند نفوذ آنرا تسهیل می‌کند، مرتبط است.

برای بررسی بیشتر از میکروسکوپ الکترونی استفاده شد. نتایج به دست آمده در شکل (۷) آورده شده است. از آنالیز EDS نیز برای تشخیص تقریبی درصد عناصر هر فاز استفاده شد. نتایج نشان داد که در نمونه الف، فاز Fe_3Si تشکیل شده است. در دومین تصویر (شکل ۷ ب)، مقادیر نسبتا برابر از نسبت مولی آهن و سیلسیم حاکی از تشکیل فازFeSi است و در قسمت ج، فاز $FeSi_2$ در کنار مقادیری از FeSi در نمونه تشخیص داده شد. البته در همه نمونه‌ها مقادیری از فازهای مواد اولیه نیز به چشم می‌خورد. این نتایج هم، بررسی‌های پیشین را تایید می‌کند.

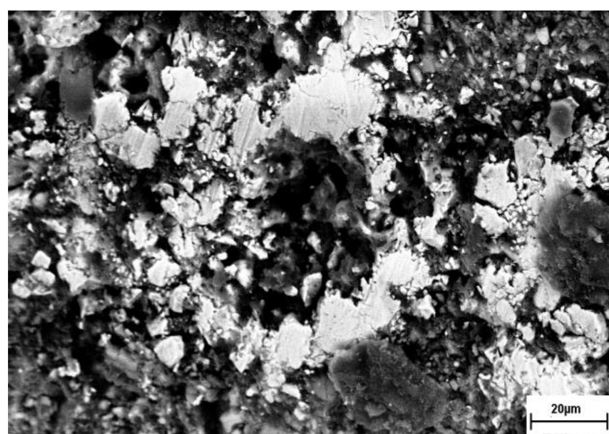


شکل ٦ نتیجه XRD نمونه حاوی نسبت مولی ۱ به ۲ از آهن و سیلسیم که به مدت ۳ ساعت در دماهای ۸۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار گرفته است

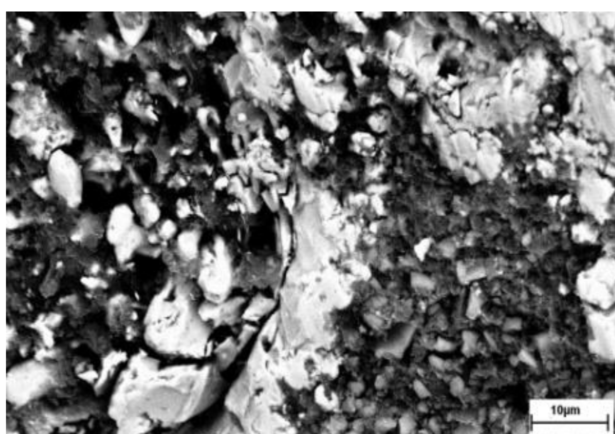
مکانیزم روند واکنش‌های رخ داده در سیستم آهن–سیلسیم با نسبت‌های مولی مورد بحث در این تحقیق، در شکل (۸) به صورت شماتیک آورده شده است. همانطور که در این شکل نمایش داده شده است، در نسبت مولی ۱ به ۰٫۵ از آهن و سیلسیم در احتمالا ابتدا فاز Fe_3Si_5 به دلیل دارا بودن مینیموم انرژی آزاد مورد نیاز جهت تشکیل، ایجاد می‌شود. در ادامه با نفوذ بیشتر سیلسیم به داخل آهن و عبور از این لایه تشکیل شده، ابتدا فاز FeSi و در ادامه فاز Fe_3Si شکل می‌گیرد. با ادامه این روند از ضخامت FeSi کاسته و بر میزان Fe_3Si افزوده می‌شود.

برای نسبت مولی ۱ به ۱ از آهن و سیلسیم در حالت پودری، فاز FeSi فاز غالب است که از همان ابتدا مشاهده می‌شود و تا انتهای اتمام مواد اولیه در ریز ساختار وجود دارد. علت عدم مشاهده فاز Fe_3Si_5 یا کم بودن آنرا می‌توان به نسبت مناسب آهن و سیلسیم با نسبت برابر برای تولید FeSi مرتبط دانست. چنانچه مقادیری از Fe_3Si_5 نیز در ابتدا در این نسبت استوکیومتری تولید شده یا اندک است یا پس از مدت کوتاهی جای خود را به فاز FeSi می‌دهد.

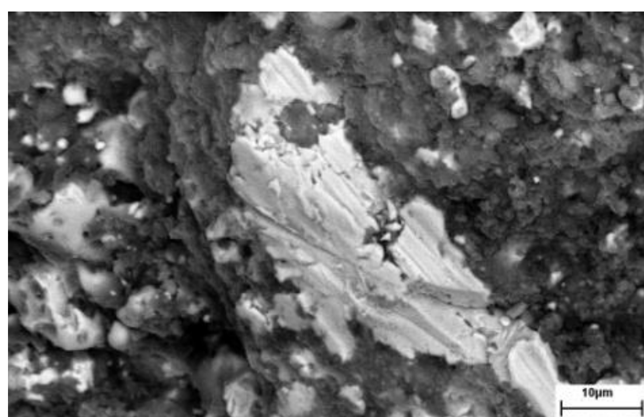
نهایتا در نسبت استوکیومتری ۱ به ۲ از آهن و سیلسیم، ابتدا فاز FeSi تولید می‌شود و در ادامه به دلیل موجود بودن مقادیر اضافه بر این نسبت از سیلسیم، این محتوا از سیلسیم می‌تواند فاز $FeSi_2$ را نیز تولید نماید



(الف)

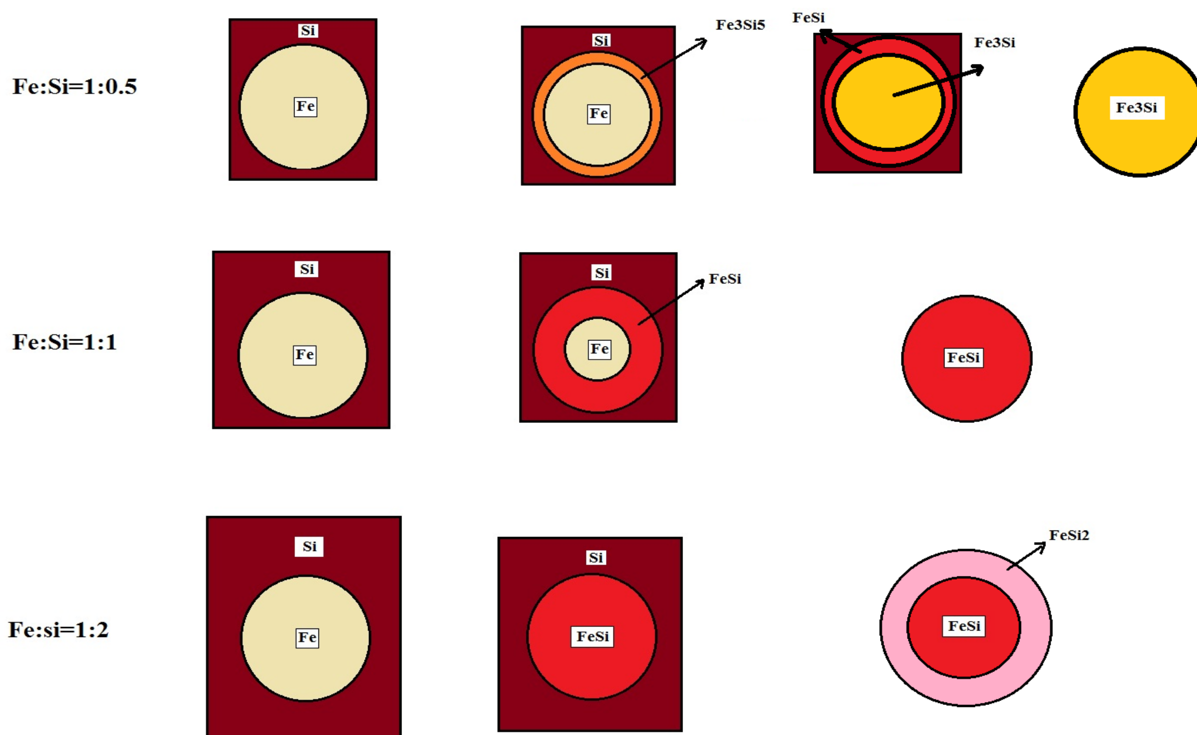


(ب)



(ج)

شکل ۷ تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی تهیه شده از نمونه‌های حاوی نسبت‌های مولی الف)۱به ۰٫۵، ب)۱به ۱ و ج)۱به ۲ از آهن و سیلسیم که برای مدت زمان ۳ ساعت در دمای ۱۰۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار گرفته است



شکل ۸ مکانیزم پیشنهادی واکنشهای انجام شده در نسبت‌های مولی پودری ۱ به ۰,۵ ، ۱ و ۲ از آهن و سیلسیم

نتیجه گیری

در این تحقیق در درصدهای مختلف آهن و سیلسیم از لحاظ ترمودینامیکی، ترکیبات پایدار مورد بررسی قرار گرفت، از نرم-افزار HSC برای پیش بینی ترمودینامیکی این واکنشها استفاده شد و در ادامه نتایج حاصل با مقادیر واقعی مقایسه شد. نتایج بررسیهای ترمودینامیکی نشان داد که در ابتدا با ورود سیلسیم به آهن و واکنش با آن فاز Fe_3Si تولید می‌شود. با افزایش میزان بیشتری از Si، فاز غالب سیستم FeSi خواهد بود. نهایتا با افزایش بیشتر سیلسیم از مقدار FeSi کاسته و به مقدار $FeSi_2$ افزوده می-شود.

نتایج عملی نیز نشان داد که با افزایش نسبت مولی سیلسیم از ۰/۵ به ۱ و ۲ ، به ترتیب، فازهای Fe_3Si، FeSi و $FeSi_2$ فازهای غالب موجود در ساختار خواهند بود و این امر تا حد زیادی با پیش‌بینی‌های ترمودینامیکی انجام شده دراین تحقیق نیز مطابقت داشت.

مراجع

1. Kolel-Veetil, M. K., Qadri, S. B., Osofsky, M., Keller, T. M., Goswami, R., and Wolf, S. A., "Size-Induced Effects on the Superconducting Properties of Mo2C Nanoparticles", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 111, pp. 16878-16882, (2007).
2. Hamayaa, K., Ueda, K., Kishi, Y., Ando, Y., Sadoh, T., and Miyaob, M., "Epitaxial ferromagnetic $Fe_3Si/Si(111)$ structures with high-quality heterointerfaces", *Applied Physic Letter*, Vol. 93, No. 13, pp. 132117-132121, (2008).
3. Mantovan, R., Georgieva, M., Fanciulli, M., Goikhman, A., Barantcev, N., Lebedinskii, Y., and Zenkevich, A., "Synthesis and characterization of Fe3Si/SiO2 structures for spintronics", *physica status solidi*, Vol. 205, pp. 1753-1757, (2008).
4. Guan, J., Chen, X., Zhang, L., Wang, J., and C, Liang., "Rapid preparation and magnetic properties of Fe_3Si-Al_2O_3

nanocomposite by mechanical alloying and heat treatment", *physica status solidi,* Vol. 213, pp. 1585-1591, (2016).

5. Schmitt, A. L., Bierman, M. J., Schmeisser, D., Himpsel, F. J., and Jin, S., "Synthesis and Properties of Single-Crystal FeSi Nanowires", *Nano Letters,* Vol. 6, pp. 1617-1621, (2006).
6. Fu, C., Krijin, M. P., and S, Daniach., "Electronic structure and optical properties of FeSi, a strongly correlated insulator", *Phys Rev B Condens Matter,* Vol. 49, pp. 2219-2222, (1994).
7. Filonov, A. B., Migas, D. B., Shaposhnikov, V. L., Dorozhkin, N. N., Petrov, G. V., and Borisenko, V. E., "Electronic and related properties of crystalline semiconducting iron disilicide", *Journal of Applied Physics,* Vol. 79, (1996).
8. Antonov. V. N, Jepsen. O, Henrion. W, Rebien. M, Stauß. P, and Lange. H, "Electronic structure and optical properties of β-$FeSi_2$", *Physical Review B,* Vol. 57, pp. 8934-8938, (1998).
9. Kulatov, E., Nakayama, H., and Ohta, H., "Electronic and Optical Properties of α-, β-, and γ-FeSi2", *Journal of the Physical Society of Japan,* Vol. 70, pp. 2199-2204, (2001).
10. Dahal, N., and Chikan, V., "Phase-Controlled Synthesis of Iron Silicide (Fe3Si and FeSi2) Nanoparticles in Solution," *Chemistry of Materials*, Vol. 22, pp. 2892-2897, (2010).
11. Tanaka, N., Sumiyama, K., Katoh, R., Hihara, T., Sato, K., Konno, T. J., and Mibu, K., "Core-Shell Formation and Juxtaposition in Fe and Si Hybrid ClustersPrepared by Controlling the Collision Stages", *Materials Transactions,*, Vol. 51, pp. 1990-1996, (2010).
12. Shen, Q., Li, R., Yuan, W. J., Zhang, L. M., and Zhang, T., "Powder reaction mechanism in fabrication of high silicon iron alloy", *Powder Metallurgy,* Vol. 50, pp. 336-340, (2007).
13. Dezsi, I., Fetzer, C., Bujdoso, L., Broetz, J., and Balogh, A. G., "Mechanical alloying of Fe-Si and milling of α- and β-FeSi2 bulk phases," *Journal of Alloys and Compounds,* vol. 508, pp. 51-54, (2010).
14. Li, G., Shi, N., Xiong, M., Ma, Z., Bai, W., and Fang, Q., "X-ray diffraction investigation of native Si-Fe alloy minerals from Luobusha, Tibet", *Frontiers of Earth Science in China,* Vol. 1, pp. 21-25, (2007).
15. Crecelius, G., "Reaction of iron on silicon", *Applied Surface Science,* Vol. 65-66, pp. 683-689, (1993).
16. Kubaschewski, O., and Okamoto, H., *Phase diagrams ofbinary iron alloy*: ASM International, (1993).
17. "HSC Chemistry ", Vol. A. Roine, 5.11 ed. Finland: Outokumpu Research, (2002).
18. Razavi, R., Hosseini, S. M. A., and Ranjbar, M., "Production of Nanosized Synthetic Rutile from Ilmenite Concentrate by Sonochemical HCl and H2SO4 Leaching", *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE),* Vol. 33, pp. 29-36, (2014).
19. Sadeghi, N., Akbarpour, M. R., and Aghajani, H., "A novel two-step mechanical milling approach and in-situ reactive synthesis to fabricate TiC/Graphene layer/Cu nanocomposites and investigation of their mechanical properties", *Materials Science and Engineering: A,* Vol. 734, (2018).
20. Yeh, C.-L., and Chen, K.-T., "Synthesis of FeSi-Al2O3 Composites by Autowave Combustion with Metallothermic Reduction", *Metals,* Vol. 11, pp. 258, (2021).